La-CoNGA-Physics

Mecánica Estadística Avanzada

3

Ausencia de Magnetización espontánea en 1-d

Profesora
GLORIA BUENDÍA

Departamento de Física
Universidad Simón Bolívar
Caracas-Venezuela
buendia@usb.ve

Junio-Julio 2023

Contenido General

1. Ausencia de Magnetización espontánea en 1-d *(Peicrls)*

Modelo de *Ising* en $1-d$ en ausencia de campo externo

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \qquad J > 0$$

Si tenemos una cadena de espines todos paralelos en $1-d$

$$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \qquad \underbrace{E_p}_{} = -NJ \qquad S_{N+1} = S_1$$

$\hookrightarrow$ Condiciones de borde períodicas

$$E_L = -(N-1)J \qquad \text{Condiciones de borde libres}$$

Esta configuración tiene mínima entropía y mínima energía.

Qué pasa si introducimos un mínimo de desorden, rompiendo un enlace? Creando una barrera

$$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \qquad \begin{aligned} E_p &= -(N-2)J + 2J \\ &= -NJ + 4J && \text{(Condiciones de borde períodicas)} \\ E_L &= -(N-2)J + J = -NJ + 3J && \text{(Condiciones de borde libres)} \end{aligned}$$

El costo energético de romper el enlace

$$\Delta E_p = 4J$$
$$\Delta E_L = 2J$$

La entropía del sistema completamente ordenado es 0

$$S_0 = K \ln 1 = 0 \qquad \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$$

Entropía del sistema con un enlance roto

$$S' = K \ln(N-1) \qquad \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$$

Hay $N-1$ sitios donde se puede romper el enlace

La variación de energía libre asociada a la creación de una barrera

$$\Delta A = \Delta E - T\Delta S = 4J - KT \ln(N-1)$$

Para sistemas macroscópicos, N es grande

$$\Longrightarrow \text{ Si } T \neq 0\,^{\underline{o}}K \qquad \Delta A < 0$$

Si $T = 0\,^{\underline{o}}K$ la creación de una barrera siempre minimiza la energía libre. A $T \neq 0\,^{\underline{o}}K$ la configuración con todos los espines paralelos no es estable, la creación de barreras es favorecida.

La configuración ordenada a $T \neq 0$ no es estable, el desordenar el sistema siempre baja la energía libre.

En $1-d$ el desorden es favorecido frente al orden, $T > 0$

En $1-d$ los sistemas en equilibrio solo pueden tener transiciones de fase a $T = 0\,^{\underline{o}}K \longrightarrow$ Resultado general para sistemas con interacciones de corto alcance.

Qué pasa si aumentamos la dimensionalidad del sistema?

Se hace más difícil desordenar el sistema.

Ejemplo: *Ising* en $2-d$ en una red con número de cordinación z

$$\begin{array}{ccccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{array}$$

Hay $\frac{N}{2}z$ conexiones

$$E_0' = -J\frac{Nz}{2} \qquad \text{(Red cuadrada } z=4\text{)}$$

Variación energética asociada a la creación de una barrera

$$\begin{array}{ccccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \end{array}$$

Para una red cuadrada $N = L \times L$, hay $\sim 2L$ enlaces rotos (condiciones de borde periódicas), $O \sim L$ enlaces rotos (condiciones de borde libres)

$$E_L' = -J\left[\frac{NZ}{2} - L\right] + JL$$

$$\begin{array}{ll} \uparrow\uparrow & \mathrm{e}_0' = -J \\ \downarrow\uparrow & \mathrm{e}_f' = +J \\ & \Delta \mathrm{e} = 2J \end{array}$$

$\Delta E = E_L - E_0 = 2JL = 2J\sqrt{N} \rightarrow$ Coste energético de crear una barrera en $2-d$

$\Delta S = K\ln(L-1) = K\ln\left(\sqrt{N}-1\right) \rightarrow$ Cambio de entropía al crear una barrera

$$\Delta A = \Delta E - T\Delta S \approx 2J\sqrt{N} - KT\ln\left(\sqrt{N}\right)$$

Dependiendo de N, ΔA puede ser positivo o negativo

Si $\Delta A > 0$ (T **bajas**) Se favorece el orden.

Si $\Delta A < 0$ (T **altas**) Se favorece el desorden.

Esto permite dar un estimado de la T_C

$$\begin{aligned} \Delta A = 0 &\implies 2J\sqrt{N} - KT_C\ln\sqrt{N} = 0 \\ &\implies KT_C = \frac{2J\sqrt{N}}{\frac{1}{2}\ln N} = 4J\frac{\sqrt{N}}{\ln N} \end{aligned}$$

Note que T_C depende de tipo de red (depende de z)

El modelo de *Ising* es uno de los pocos modelos de partículas interactuantes para el que se conoce solución exacta, y es el más simple de ellos.

en 1 y 2 dimensiones

Tiene un papel fundamental en la comprensión del ferromagnétismo y de las transiciones de fase. El modelo de *Ising* y generalizaciones del mismo son útiles para entender una variedad de fenómenos, no solo en la física, sino en otras interdisciplinas (biología, medicina, economía, modelos sociales).

2. Modelo de Ising en 2-d *(Onsager 1949)*

$$Z(T,H,N) = \sum_{S_1}\sum_{S_2}\cdots\sum_{S_N} e^{\beta\left[J\sum_{\langle ij\rangle} S_i S_j + H\sum_i S_i\right]}$$

Se utilizan condiciones de borde periódicas.

Fue resuelto por primera vez usando la *Técnica de matriz de Transferencia por Onsager (1949)* y por *Yang en presencia de campo externo (1952)* y posteriormente con diferentes técnicas de cálculo.

Para una red cuadrada y $H = 0$, en el límite termodinámico la energía libre por partícula

$$\beta f(T) = -\ln\left(2\cosh 2\beta J\right) - \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} d\varphi \ln\left[\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1-\kappa^2 \operatorname{sen}^2\varphi}\right)\right]$$
$$\kappa = \frac{2\operatorname{senh}(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)}$$

Se encuentra que si $T < T_C$ el sistema tiene magnetización espontánea

$$m(T) = \begin{cases} 0 & T > T_C \\ \left\{1-\left[\operatorname{senh}\left(2\beta J\right)\right]^{-4}\right\}^{\frac{1}{8}} & T < T_C \end{cases}$$

Cerca del punto crítico $m(t) \sim A(T_C - T)^{\frac{1}{8}} \implies \beta = \dfrac{1}{8}$

La capacidad calórica

$$\underbrace{C(T)}_{\hookrightarrow \text{ Diverge en } T=T_C} \sim -2\frac{K_B}{\pi}\left(\frac{2J}{K_B T_C}\right)^2 \ln\left|1-\frac{T}{T_C}\right|$$

$$K_B T_C = \frac{2J}{\ln\left(1+\sqrt{2}\right)} = 2{,}269\ J \qquad \text{(Red cuadrada)}$$

En dimensiones, $d \geq 3$ no se conoce todavía la solución exacta del modelo, en ningún tipo de red.

Pero existen soluciones aproximadas, y resultantes de simulaciones numéricas que permiten conocer los exponentes críticos con gran precisión. Por ejemplo, el exponente para la magnetización en $3-d$, es $\beta \approx \frac{1}{3}$, independiente del tipo de red cristalina, y concuerda con el exponente crítico para la transición gas líquido.

$\rightarrow$ **Universalidad:** los exponentes críticos no dependen de los sistemas microscópicos.